Title	一次元無秩序系における動的電気伝導度の計算機実験 (VIII ポスター・セッション価数揺動状態をめぐる理論の現状,科研費研究会報告)
Author(s)	金, 昌一
Citation	物性研究 (1983), 40(2): 61-61
Issue Date	1983-05-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/90915
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

一次元無秩序系における動的電気伝導度の計算機実験

東北大 理　金 昌一

一次元無秩序のアンダーソンモデル（n.n ホッピング V, サイトエネルギー $\{\varepsilon_n\}$; $-W/2\le\varepsilon_n\le W/2$）の動的電気伝導度 $\sigma(\omega)$ を MacKinnon[1] の方法を用いて, 10^6 サイトまで計算機実験によって求めた。$\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)$ は久保の公式から, N サイト系に対して

$$\mathrm{Re}\,\sigma^{(N)}(\omega)=\frac{1}{\omega}\int_{E_F-\omega}^{E_F}dE\,\mathrm{Re}\,\sigma_E^{(N)}(\omega),\quad \mathrm{Re}\,\sigma_E^{(N)}(\omega)=\frac{2e^2\hbar}{\pi N a}\mathrm{Tr}\left[v\,\mathrm{Im}\,G_\Gamma^{(N)}(E+\omega+i\gamma)\,v\,\mathrm{Im}\,G_\Gamma^{(N)}(E+i\gamma)\right]$$

ここで $v=\frac{i}{\hbar}[H,x]$ は速度演算子, $x=\sum_{n=1}^{N}x_n|n\rangle\langle n|$ は位置演算子, $x_n=na$, a は格子定数であり, $G_\Gamma^{(N)}(z)=(z-H^{(N)})^{-1}$ である。有限系を扱うために有限なエネルギー E の虚数部 γ を導入しなければならない。$\sigma_E^{(N)}(\omega)$ は x 表示でつぎのように書くことができる。

$$\sigma_E^{(N)}(\omega)=\frac{e^2}{2\pi\hbar N a}\sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N}(x_n-x_m)^2\left[\omega^2\langle n|G_\omega^{(N)}|m\rangle\langle m|G_\Gamma^{(N)}|n\rangle-(\omega+2i\gamma)^2\langle n|G_\omega^{(N)}|m\rangle\langle m|G_\Gamma^{(N)*}|n\rangle\right]$$

ここで $G_\omega^{(N)}=G_\Gamma^{(N)}(E+\omega+i\gamma)$, $G_\Gamma^{(N)}=G_\Gamma^{(N)}(E+i\gamma)$ である。MacKinnon の方法を動的な場合に拡張して, $G_\Gamma^{(N)}(z)$ の漸化式から $\sigma_E^{(N)}(\omega)$ の漸化式を求め, $N=1$ から出発して非常に大きな系の $\sigma_E^{(N)}(\omega)$ を求めることが可能である。我々は $\sigma_E^{(N)}(\omega)$ を $E=E_F=0$（E_F はフェルミエネルギー）の場合に $N=10^6$, 20 samples について計算した。計算の結果, $\sigma_E^{(N)}(\omega)$ の E 依存性は小さいので $\sigma^{(N)}(\omega)\simeq\sigma_E^{(N)}(\omega)$（$E=E_F$）とした。$W/V=1$ と $W/V=5$ の場合についての結果をそれぞれ図1と図2に示した。横軸は τ_0（Born 近似で緩和時間; $\tau_0=12\hbar V/W^2$）で, 縦軸は $\sigma_0=(e^2/\pi\hbar)2v_F\tau_0$ でスケールした。無秩序の度合の小さい領域（$E_F\tau_0\gg1$）で有効な Berezinskii[2] の厳密解（図の実線[3], 波線は Drude の理論）と比較して, $W/V=1$ の場合は ω の広い範囲でよい一致を示している。$W/V=5$（$E_F\tau_0\sim1$; $E_F=2V$）の場合でさえもバンド端の効果が現れている他は, Berezinskii の解と計算機実験とは非常によく一致している。

(1) A. MacKinnon: J. Phys. C13 (1980) L1031

(2) V. L. Berezinskii: Sov. Phys. JETP 38 (1974) 620

(3) A. A. Gogolin and V. I. Melnikov: Phys. Stat. sol. (b) 88 (1978) 377

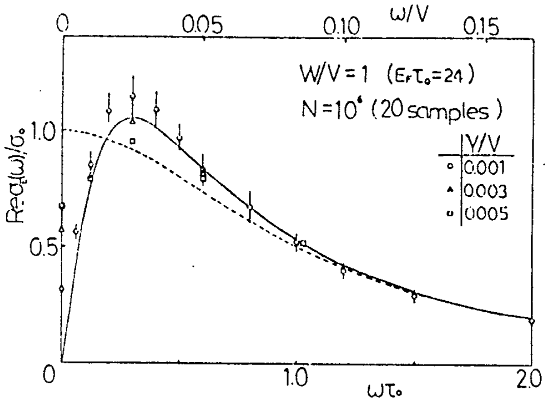

図1

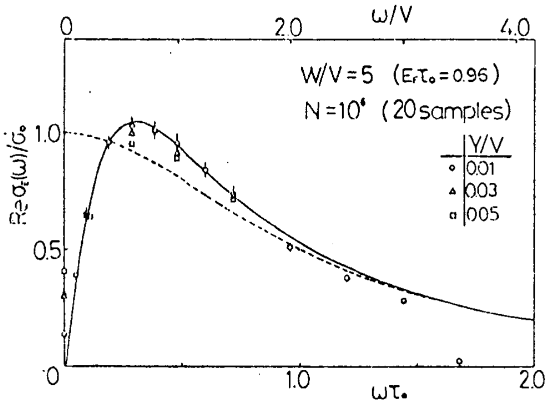

図2